



# **CHƯƠNG 2:**

## **LIÊN KẾT HÓA HỌC & CẤU TẠO PHÂN TỬ**

# Nội dung

1. Những khái niệm cơ bản về liên kết hóa học
2. Liên kết cộng hóa trị
3. Liên kết hydro
4. Liên kết Van Der Vaal

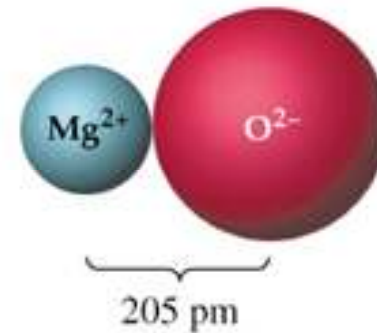
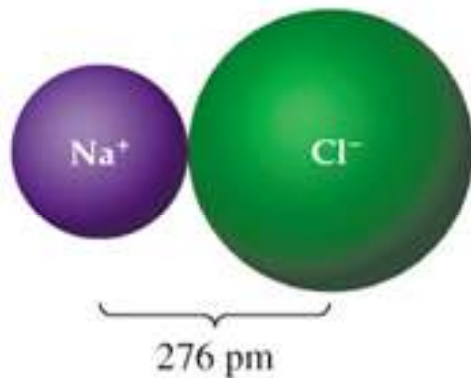
# 1. Những khái niệm cơ bản về liên kết hóa học

## 1.1 Bản chất của liên kết

- Các loại liên kết hoá học đều cùng có bản chất điện, do tương tác của hạt nhân nguyên tử và electron
- Chỉ có các electron hóa trị (electron lớp ngoài cùng tham gia vào liên kết hóa học)

## 1.2. Độ dài liên kết

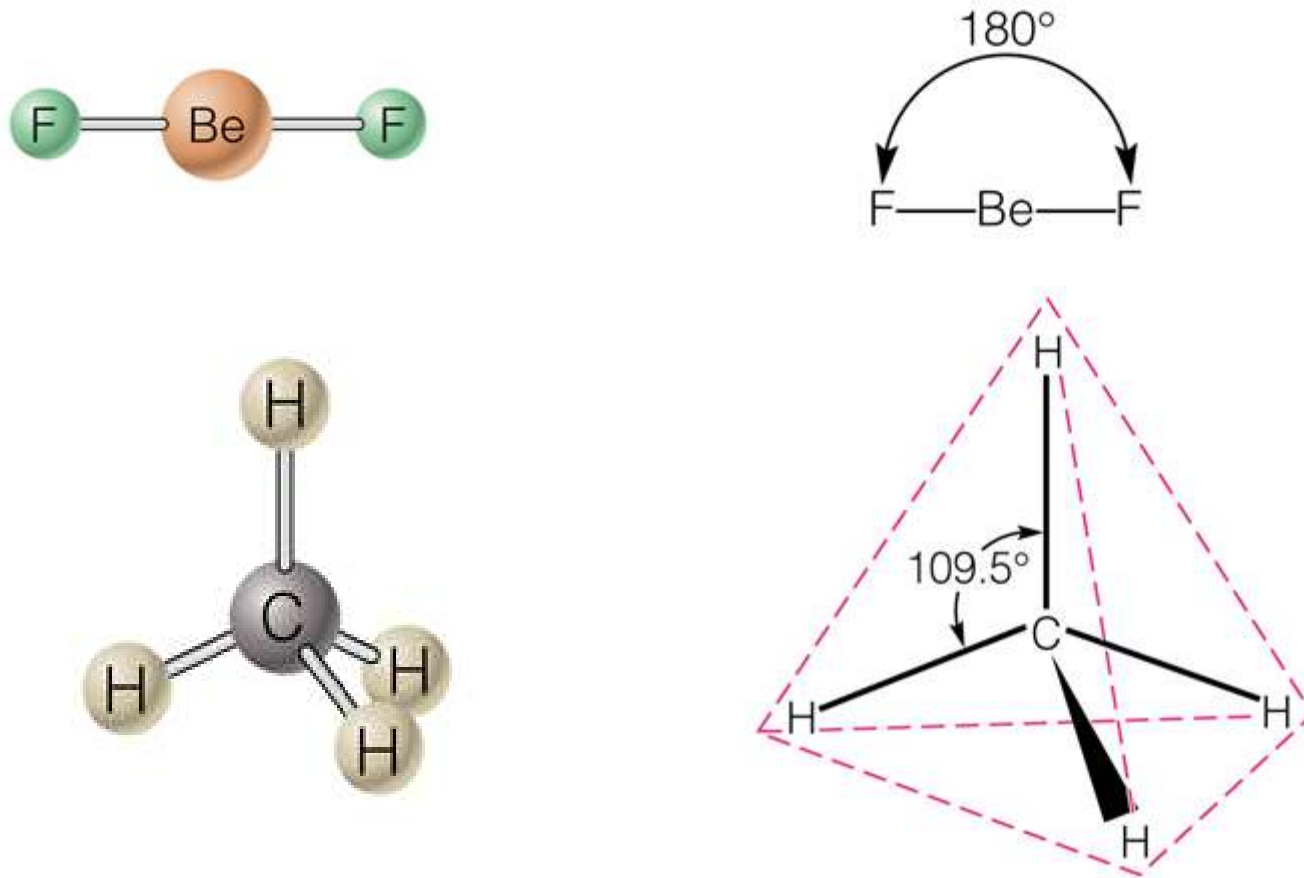
là khoảng cách giữa hai hạt nhân nguyên tử liên kết với nhau.



Ví dụ	Liên kết:	H-F	H-Cl	H-Br	H-I
	d ( $\text{Å}^0$ )	0,92	1,28	1,42	1,62

## 1.3. Góc hóa trị

Là góc tạo thành bởi 2 đoạn thẳng nối hạt nhân nguyên tử trung tâm với 2 hạt nhân nguyên tử liên kết.



## 1.4. Bậc liên kết

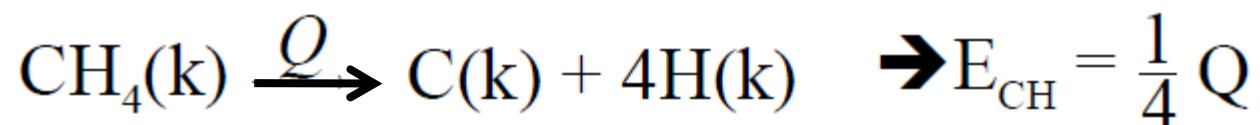
Bậc liên kết là số liên kết tạo thành giữa 2 nguyên tử tương tác trực tiếp với nhau

Etan	$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$	blk = 1
Eten	$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$	blk = 2
Etin	$\text{HC}\equiv\text{CH}$	blk = 3

## 1.5. Năng lượng liên kết

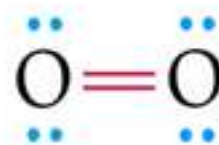
Năng lượng cần tiêu tốn để phá hủy liên kết có trong 1 mol phân tử ở trạng thái khí

$$E_{\text{H-H}} = 431 \text{ kJ/mol}$$



➤ Năng lượng liên kết càng lớn → liên kết càng bền

➤ Năng lượng liên kết phụ thuộc vào độ dài liên kết, bậc liên kết.



Bond length:

148 pm

121 pm

110 pm

Bond strength:

213 kJ/mol

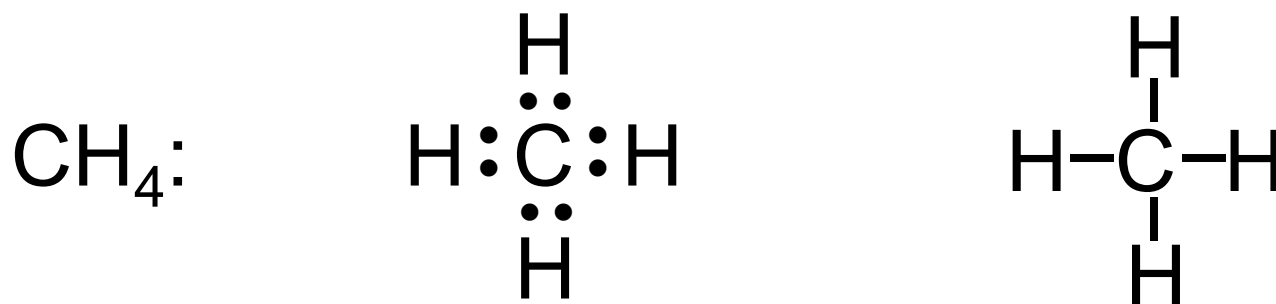
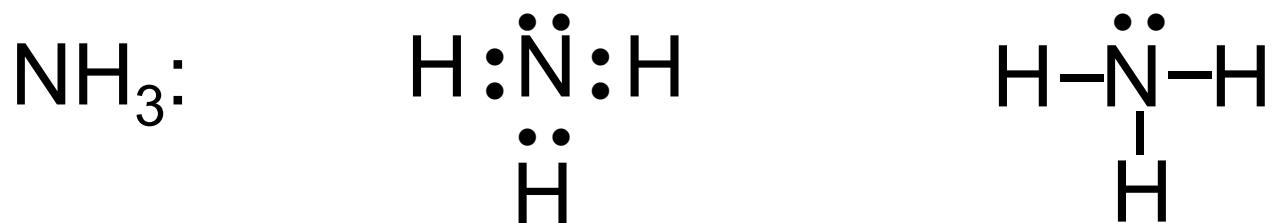
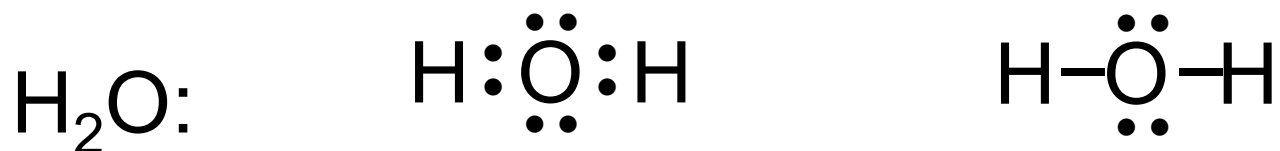
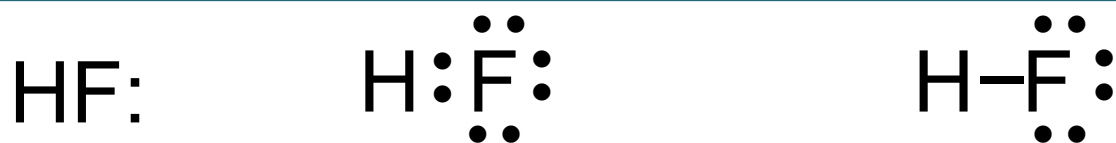
498 kJ/mol

945 kJ/mol

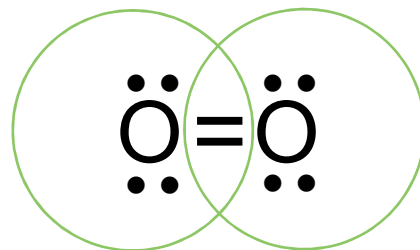


## 2. LIÊN KẾT CỘNG HÓA TRỊ

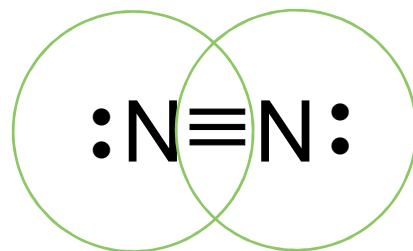
Liên kết cộng hoá trị theo Lewis (1916)



O<sub>2</sub>:



N<sub>2</sub>:

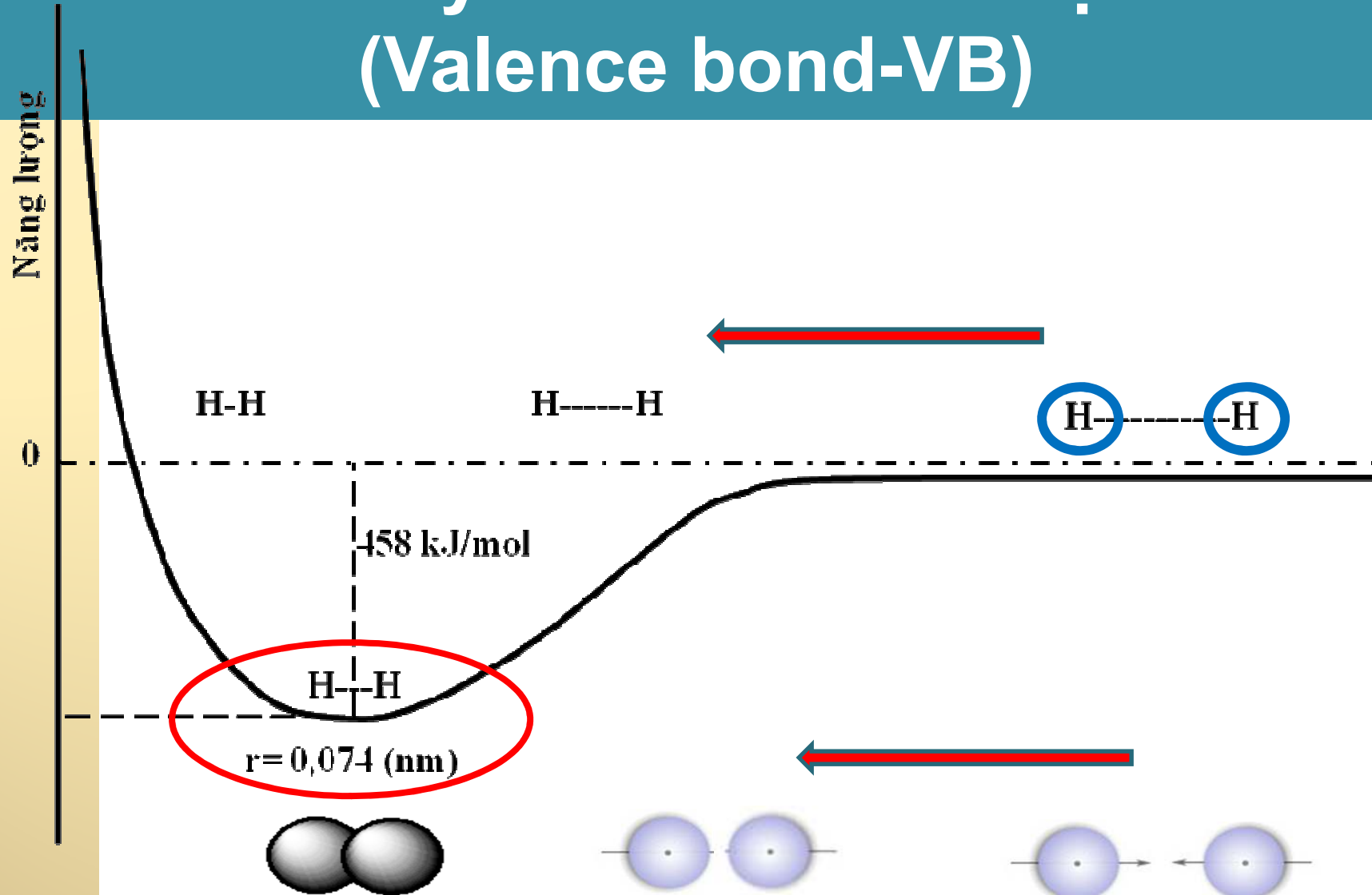


# LIÊN KẾT CỘNG HÓA TRỊ THEO CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

PHƯƠNG PHÁP LIÊN KẾT HÓA TRỊ  
(VB)

PHƯƠNG PHÁP ORBITAL PHÂN TỬ  
(MO)

# Thuyết liên kết hoá trị (Valence bond-VB)



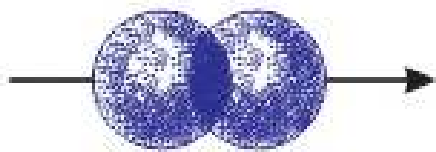
Liên kết cộng hóa trị hình thành do **sự xen phủ** của hai orbital, trong đó có 2 electron có spin trái dấu

Liên kết cộng hóa trị *càng bền* khi *độ che phủ* của các orbital nguyên tử *càng lớn*

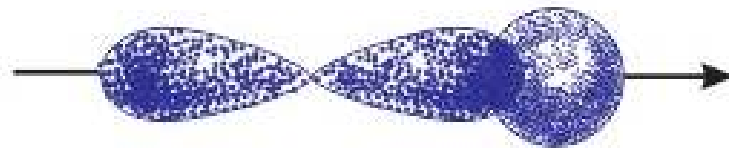
# Các kiểu xen phủ

❖ Xen phủ trực liên nhân

Liên kết sigma  $\sigma$



**s-s**



**s-p**

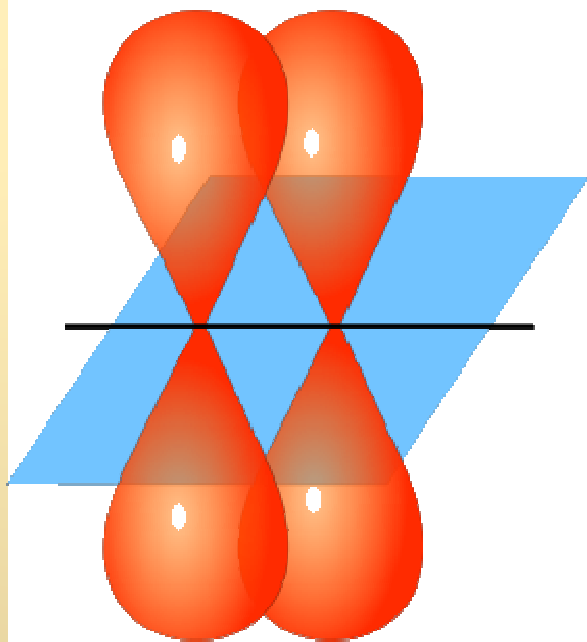


**p-p**

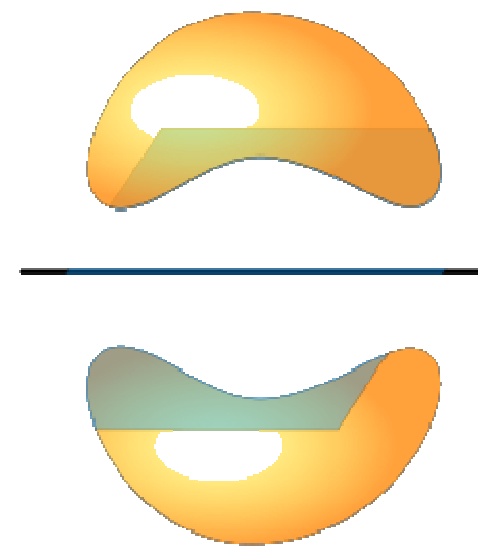
❖ Xen phủ hông (bên)



Liên kết pi  $\pi$



p-p



# Thuyết lai hóa các orbital nguyên tử

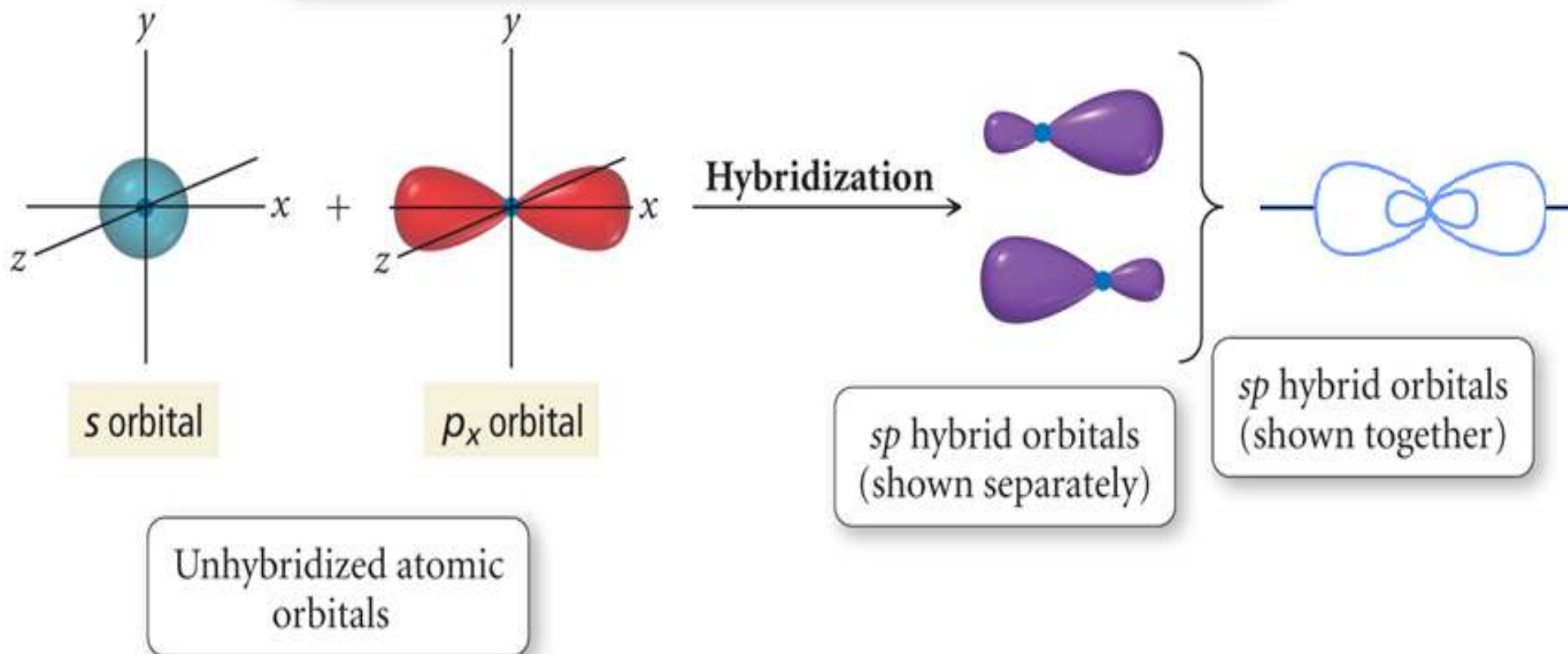
- Trước khi tham gia liên kết, các orbital s, p, d tổ hợp lại với nhau để tạo ra các orbital lai hóa.
- Có bao nhiêu AO tham gia lai hóa thì có bấy nhiêu AO lai hóa tạo thành.
- Các orbital lai hóa có năng lượng, hình dạng, kích thước giống nhau và bố trí đối xứng trong không gian.
- Các kiểu lai hóa  $sp^3$ ,  $sp^2$ ,  $sp$ ,  $sp^3d$ ,  $sp^3d^2$



# Lai hóa sp

## Formation of $sp$ Hybrid Orbitals

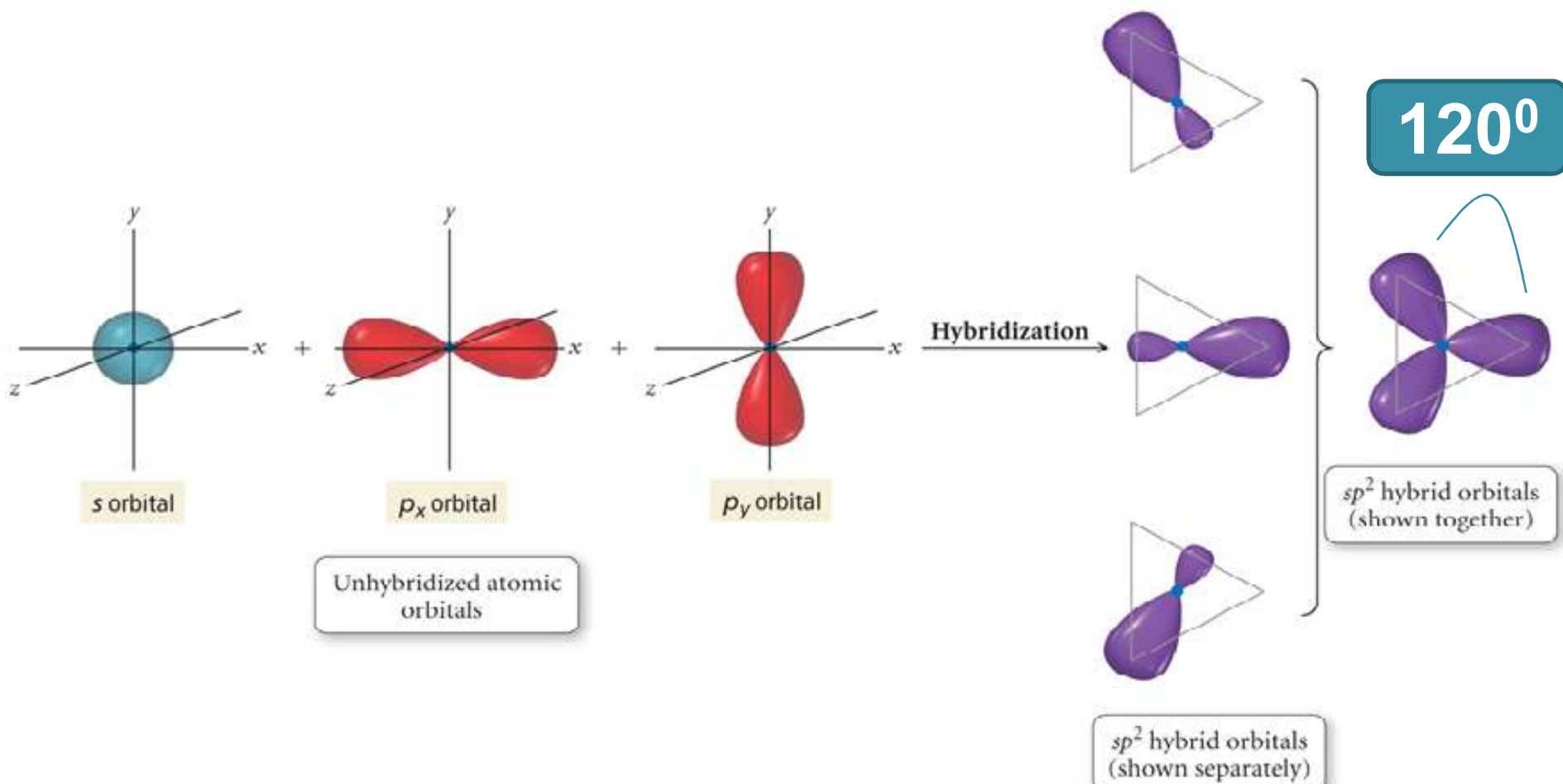
One  $s$  orbital and one  $p$  orbital combine to form two  $sp$  orbitals.



# Lai hóa $sp^2$

## Formation of $sp^2$ Hybrid Orbitals

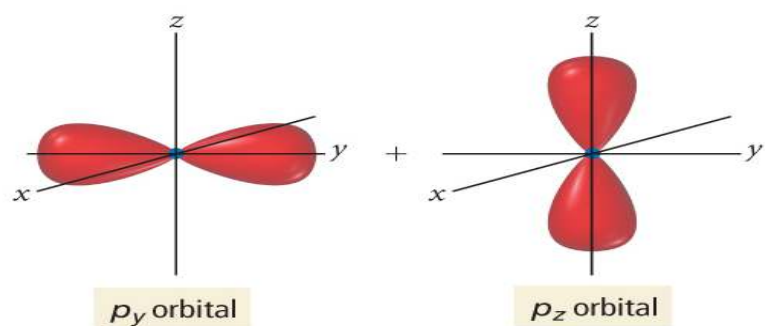
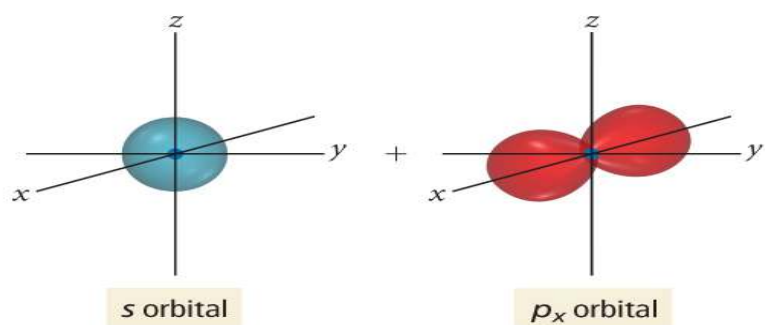
One  $s$  orbital and two  $p$  orbitals combine to form three  $sp^2$  orbitals.



# Lai hóa $sp^3$

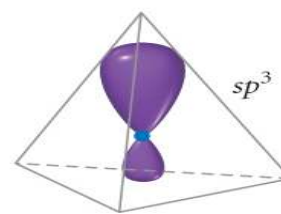
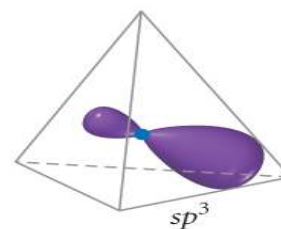
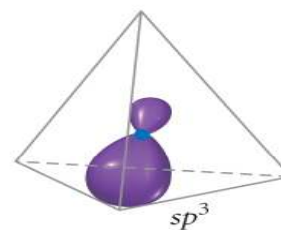
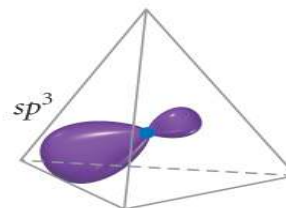
## Formation of $sp^3$ Hybrid Orbitals

One  $s$  orbital and three  $p$  orbitals combine to form four  $sp^3$  orbitals.



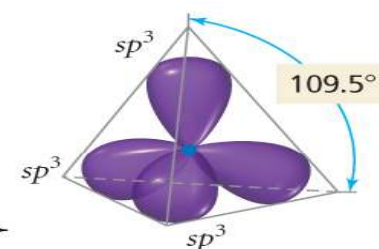
Unhybridized atomic orbitals

Hybridization  $\rightarrow$



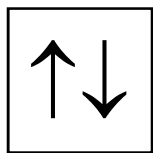
$sp^3$  hybrid orbitals (shown separately)

**109,5°**

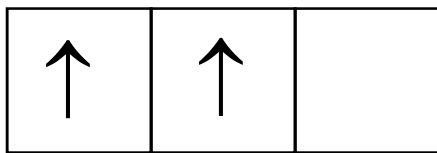


$sp^3$  hybrid orbitals (shown together)

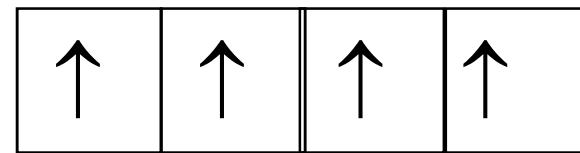
C



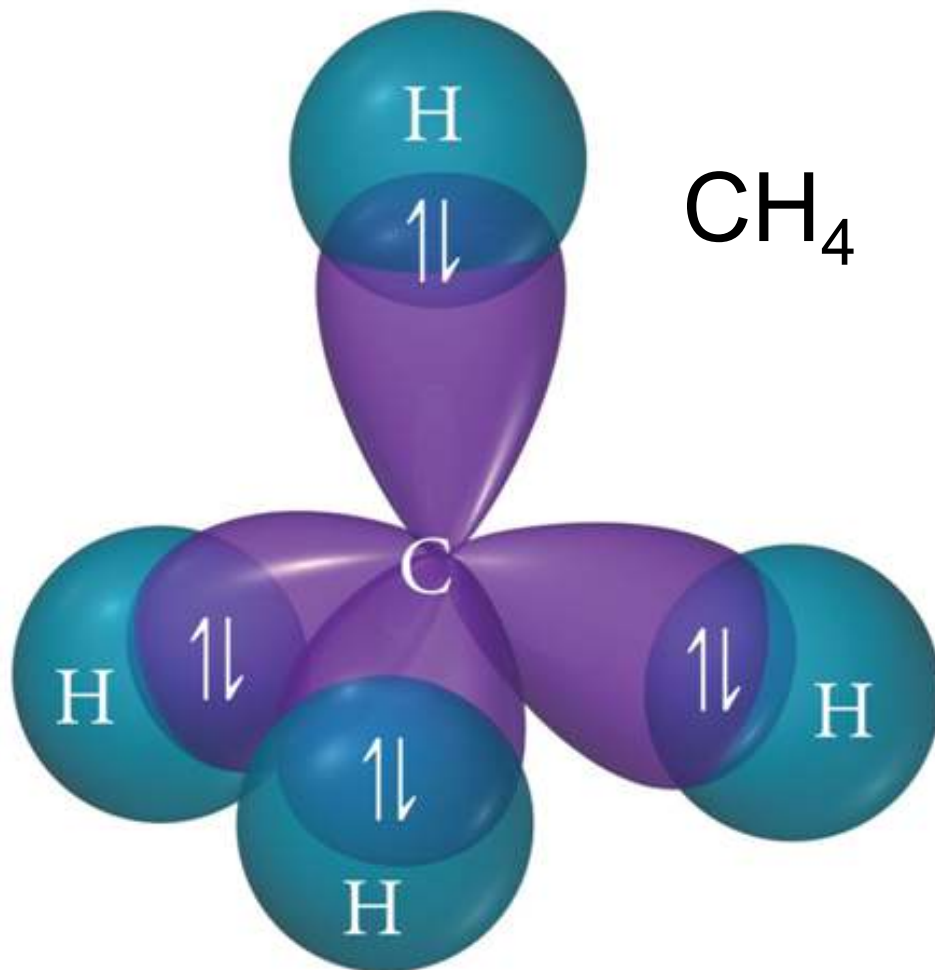
2s



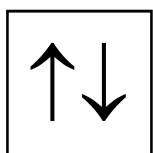
2p



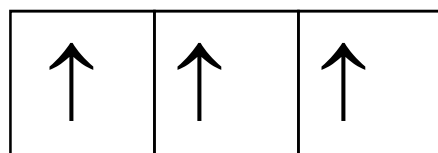
4sp<sup>3</sup>



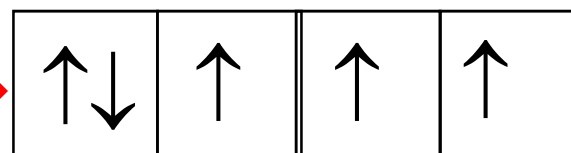
N



2s

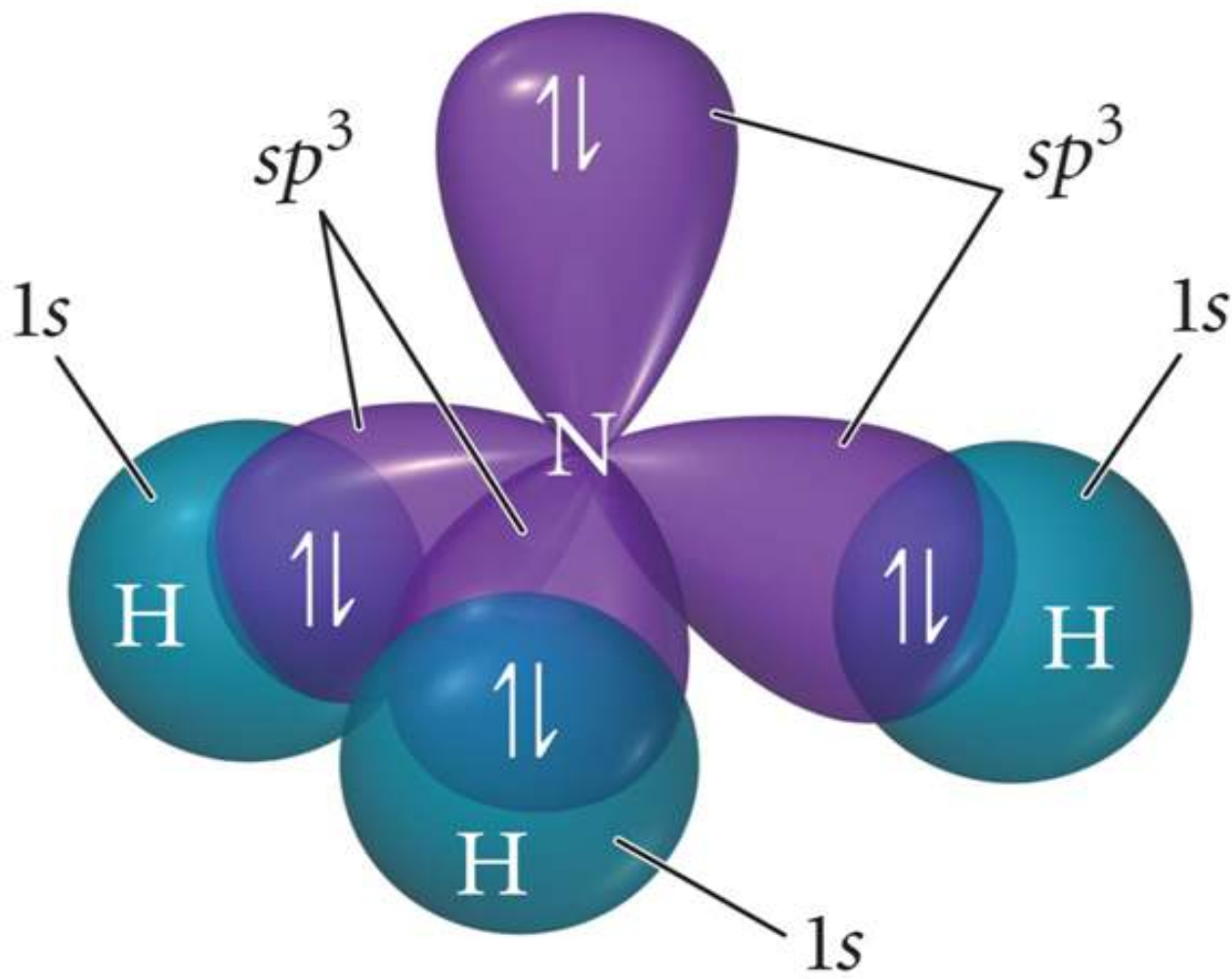


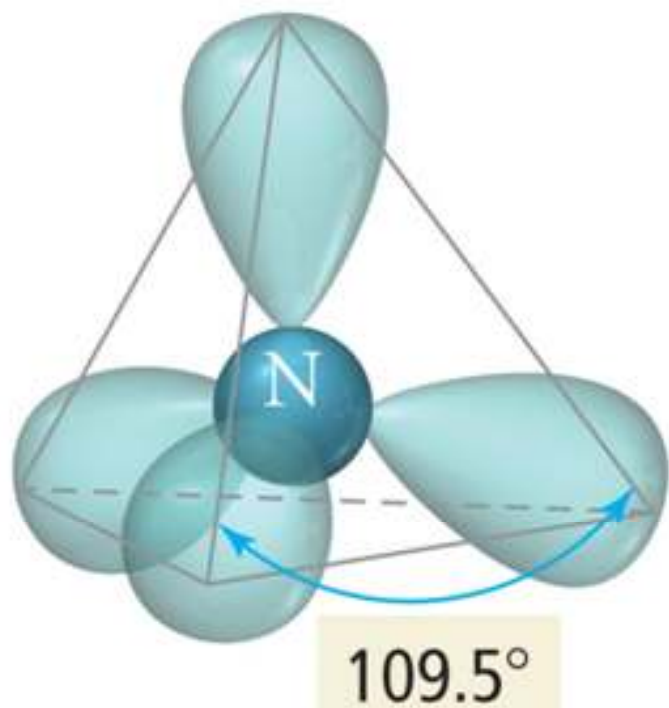
2p



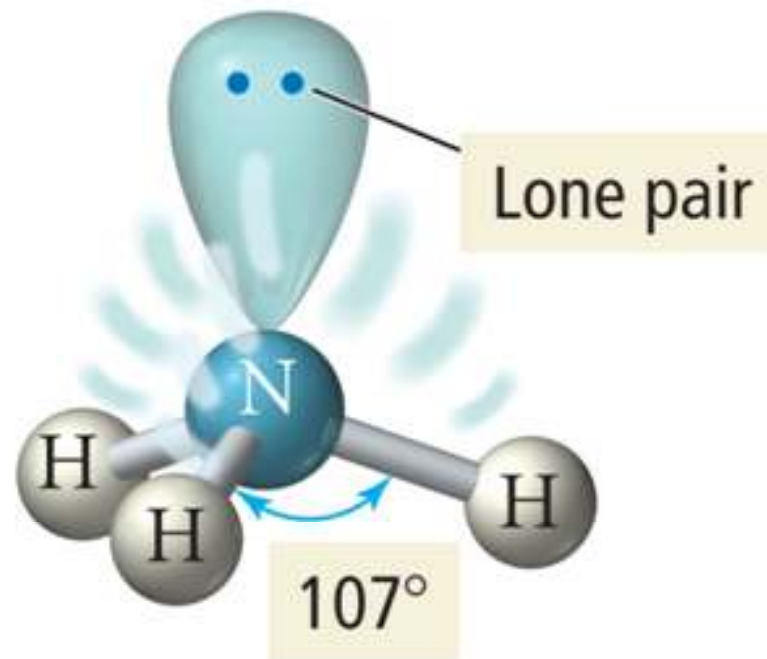
4sp<sup>3</sup>

NH<sub>3</sub>





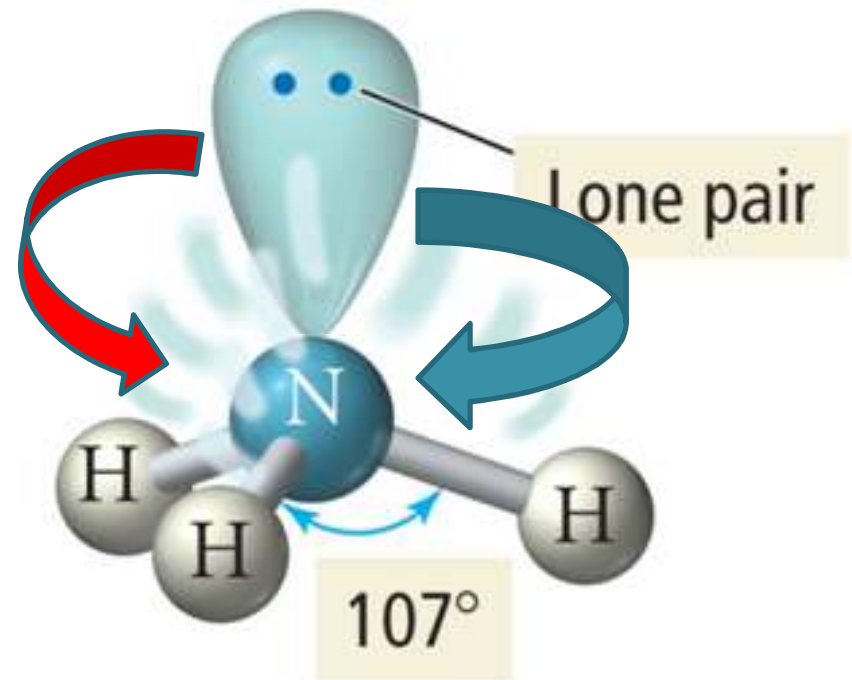
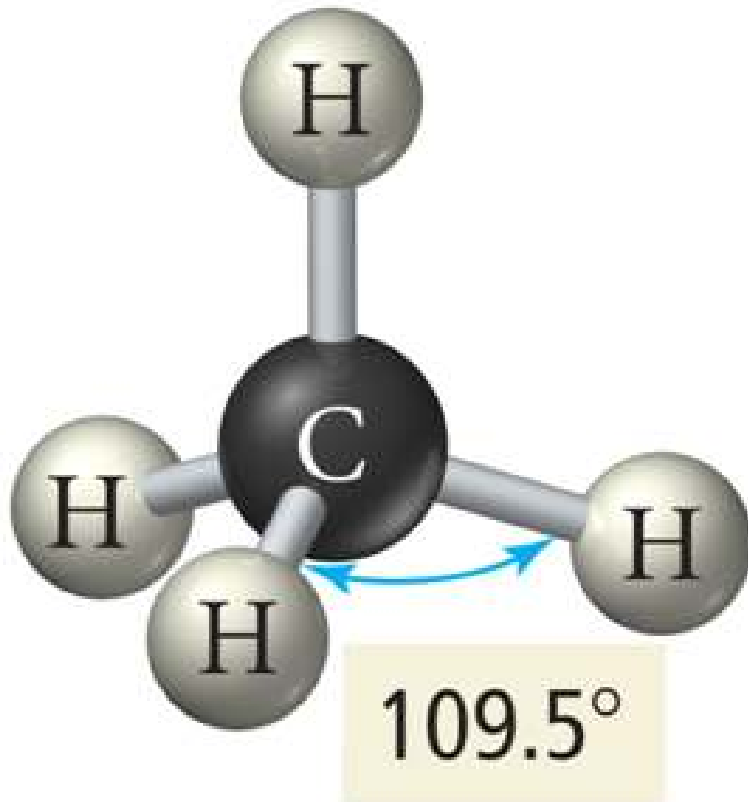
Ideal tetrahedral  
geometry



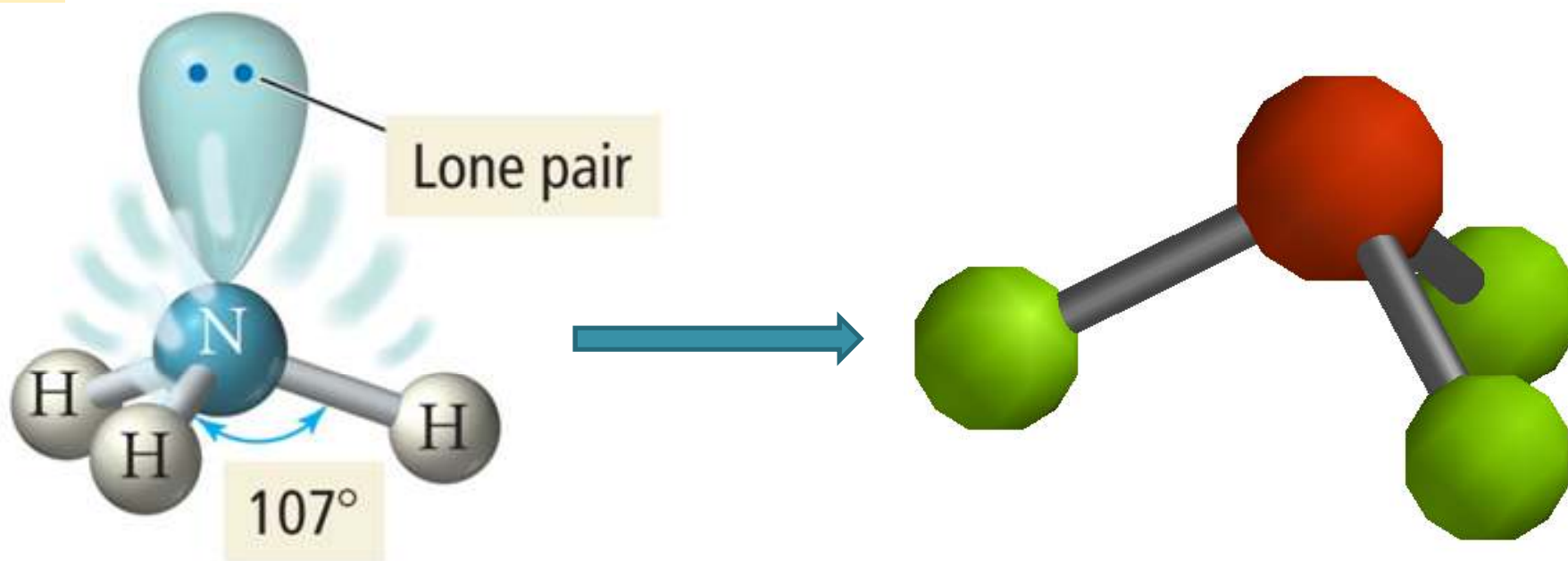
Actual molecular  
geometry

# Thuyết đẩy nhau giữa các cặp electron hóa trị (VSEPR)

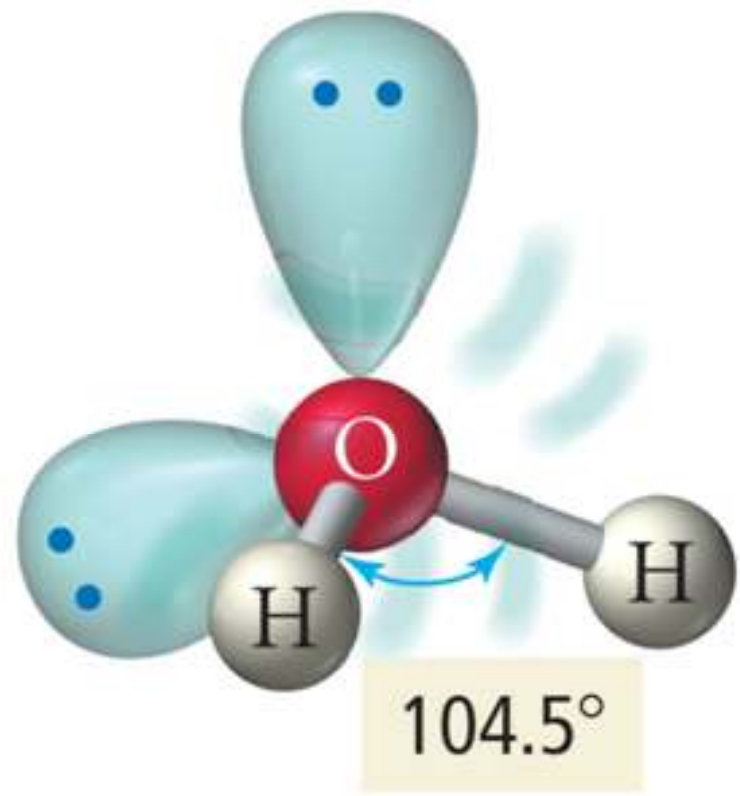
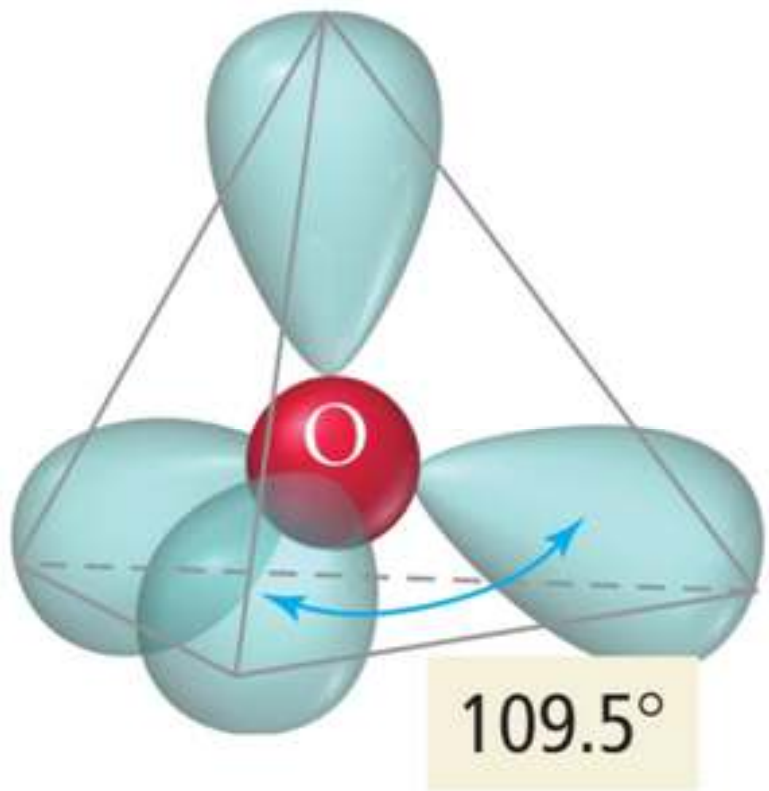
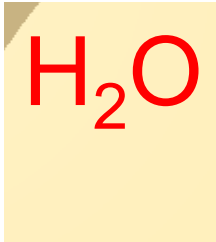
$\text{NH}_3$

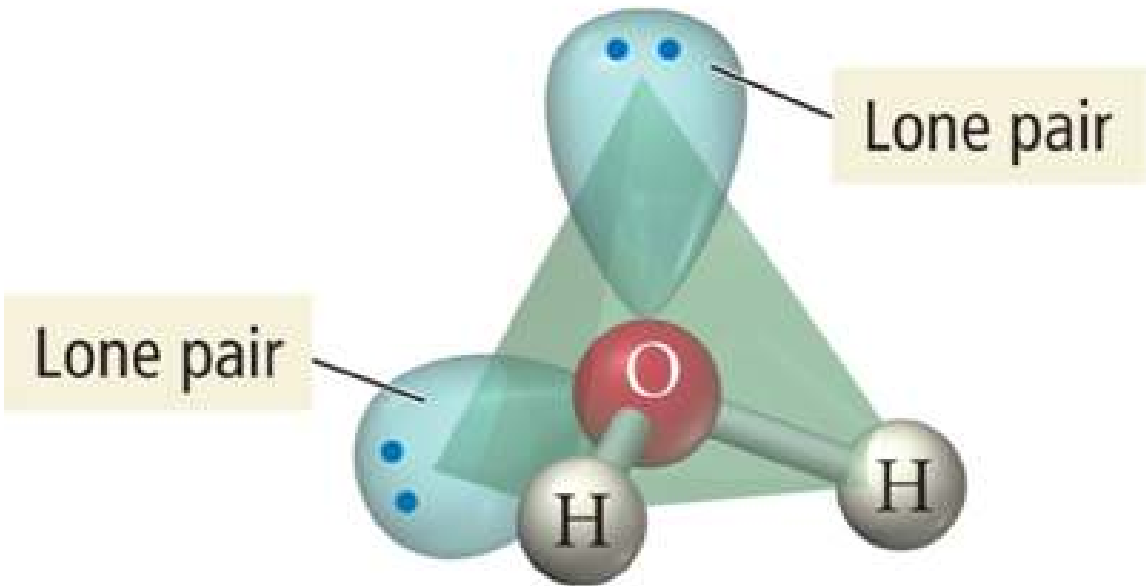
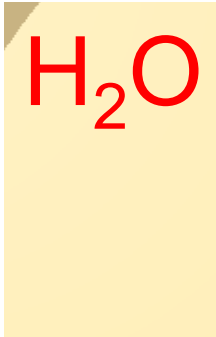


$\text{NH}_3$









# Dự đoán trạng thái lai hóa

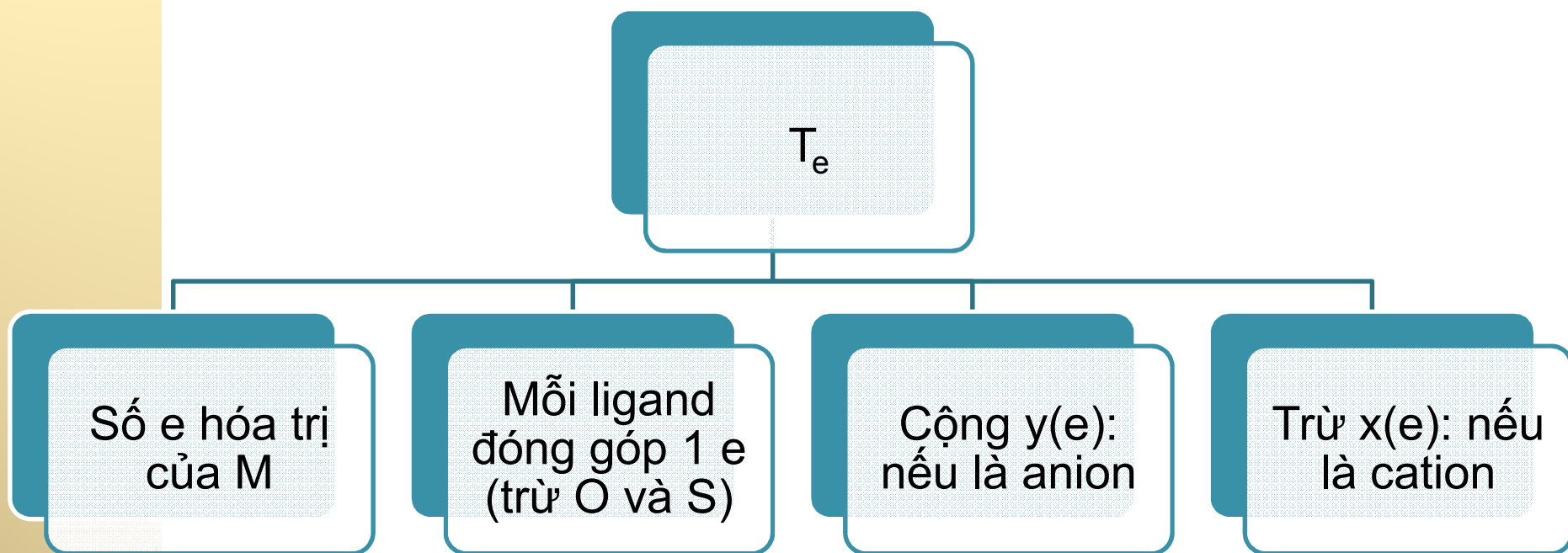
SỐ ĐIỆN TỬ ( $T_e$ )	TRẠNG THÁI LAI HÓA
4	sp
6	sp <sup>2</sup>
8	sp <sup>3</sup>
10	sp <sup>3</sup> d
12	sp <sup>3</sup> d <sup>2</sup>

# Tính $T_e$

Xét các hợp chất:  $ML_n$ ,  $ML_n^{x+}$ ,  $ML_n^{y-}$

M: nguyên tử trung tâm.

L: các nguyên tử biên (ligand)



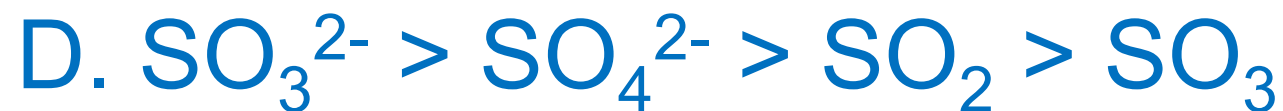
## Ví dụ

PHÂN TỬ/ ION	NGUYÊN TỬ TRUNG TÂM	$T_e$	TRẠNG THÁI LẠI HÓA
$CO_2$	C		
$NO_2$	N		
$NH_4^+$	N		
$NH_2^-$	N		
$NO_2^-$	N		
$CO_3^{2-}$	C		

❖ Ví dụ 1: Chọn câu trả lời đúng:  
trong phân tử  $\text{NH}_3$  kiểu lai hóa của N  
và dạng hình học của phân tử  $\text{NH}_3$  là:

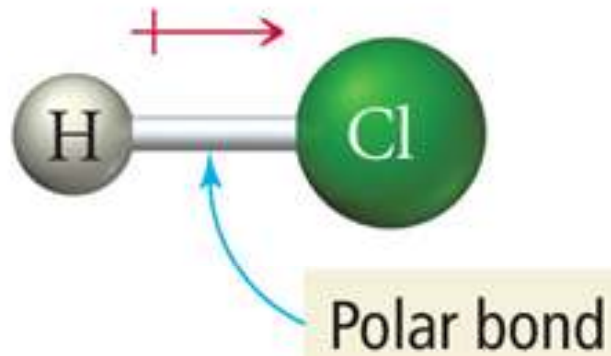
- A.  $sp^3$ , tháp tam giác
- B.  $sp^2$ , tam giác phẳng
- C.  $sp^2$ , góc
- D.  $sp$ , thẳng hàng.

❖ Ví dụ 2: Dãy có góc hóa trị OSO giảm dần:

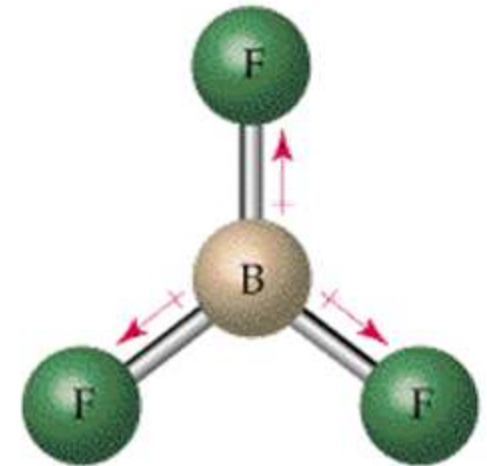
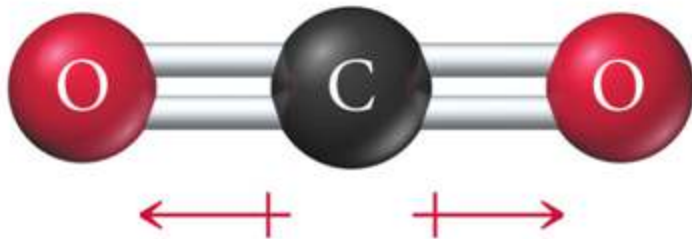


# Độ phân cực của phân tử

Momen lưỡng cực

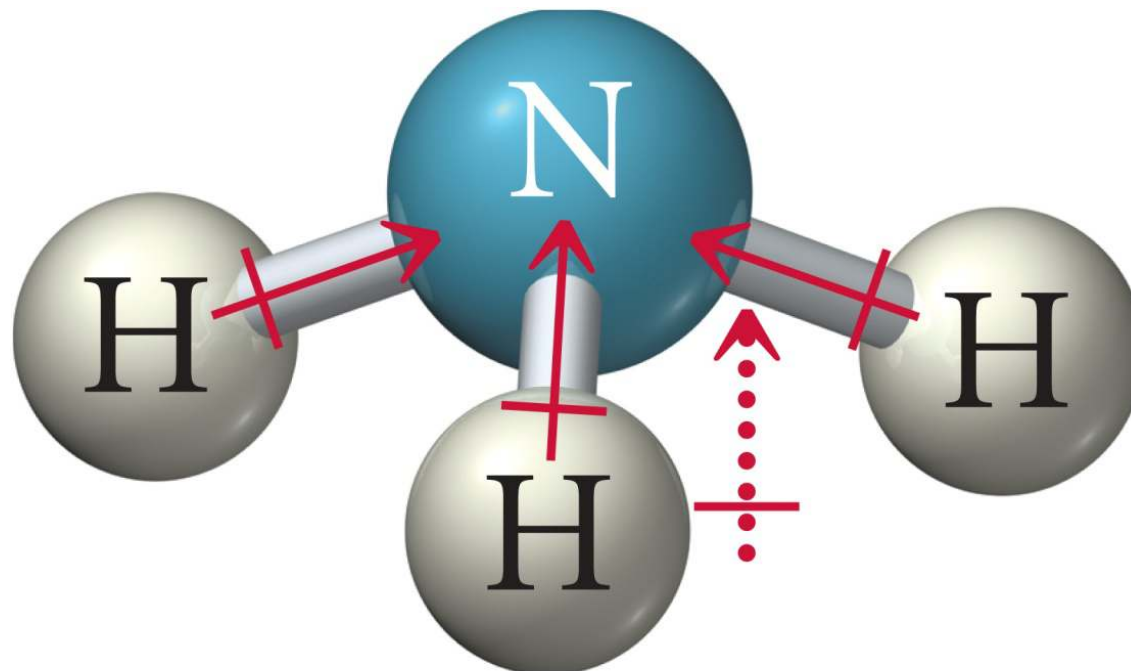
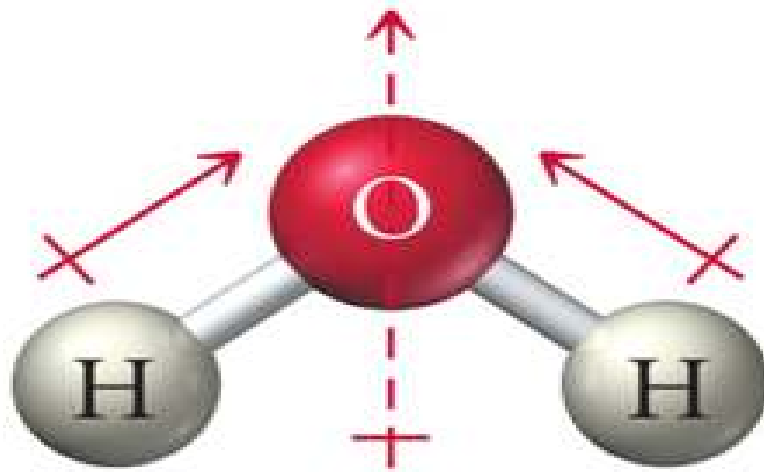


No net dipole moment



Nonpolar





Copyright © 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

❖ Ví dụ 4: Phân tử có momen lưỡng cực  $\mu = 0$ :



### 3. LIÊN KẾT HYDRO

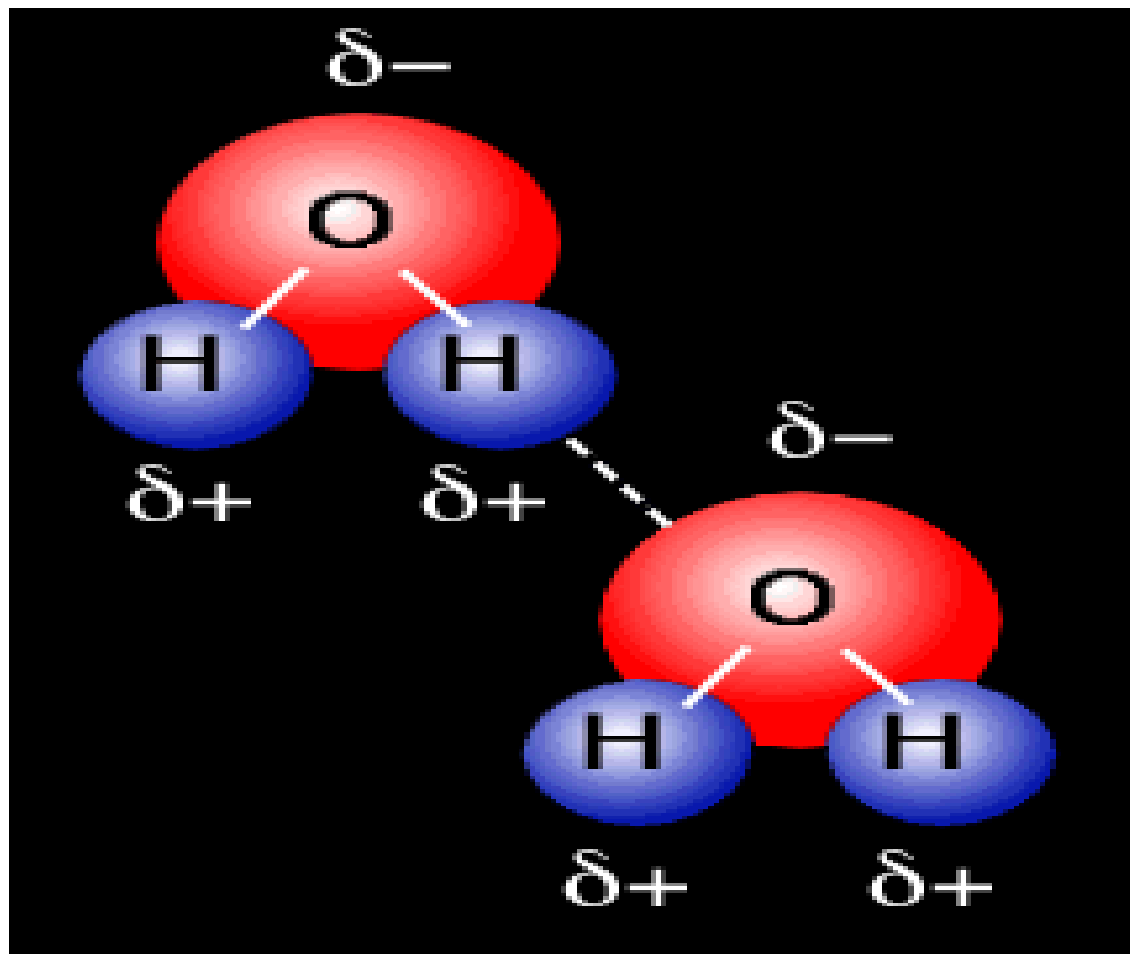
Là liên kết được hình thành bởi **nguyên tử H linh động** (H liên kết với 1 nguyên tử có độ âm điện lớn) với 1 **nguyên tử có độ âm điện lớn** khác.



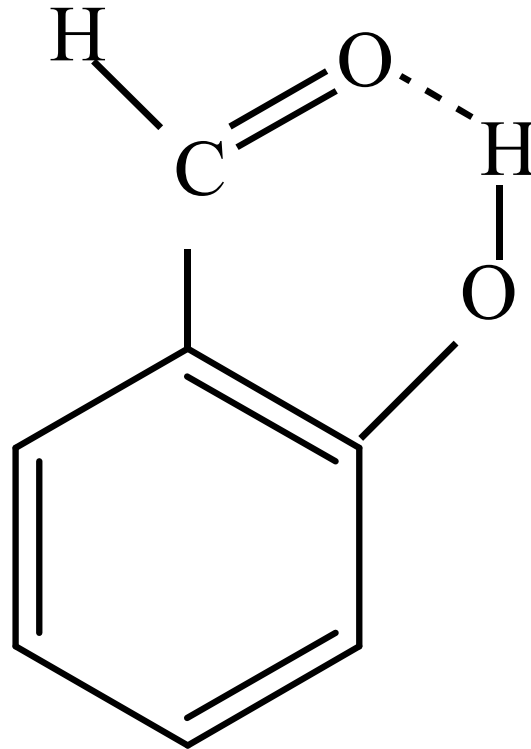
X, Y là các nguyên tử có độ âm điện lớn (**F, O, Cl, N**)

# PHÂN LOẠI

❖ Liên kết hydro **liên phân tử**



❖ Liên kết hydro **nội** phân tử



andehit salyxilic

# Ảnh hưởng của liên kết Hydro

➤ *Liên kết Hydro liên phân tử* làm tăng **hiệt độ sôi**, **hiệt độ nóng chảy** của hợp chất

○  $C_2H_5OH$  có  $t_s$ ,  $t_{nc}$  cao hơn  $CH_3OCH_3$

○  $CH_3COOH$  có  $t_s$ ,  $t_{nc}$  cao hơn  $HCOOCH_3$

➤ ***Liên kết Hydro liên phân tử*** với dung môi làm tăng **độ tan** của hợp chất trong dung môi đó.

○  $C_2H_5OH$  tan trong  $H_2O$  tốt hơn trong  $CH_3OCH_3$

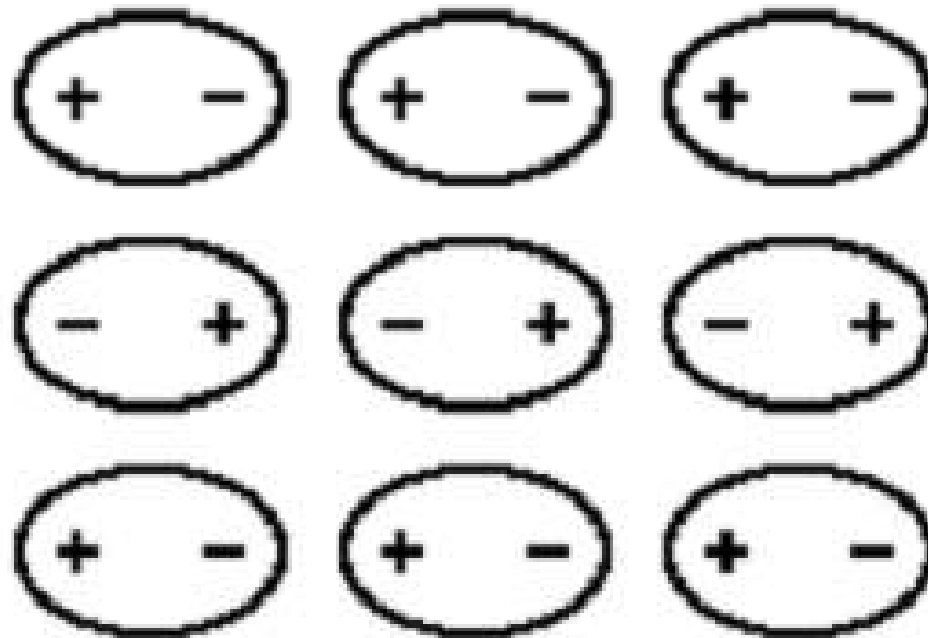
## 4. LIÊN KẾT VAN DER WALLS

- ❖ Là liên kết được hình thành giữa các phân tử trung hòa
- ❖ Có tính không định hướng, không bão hòa, không chọn lọc



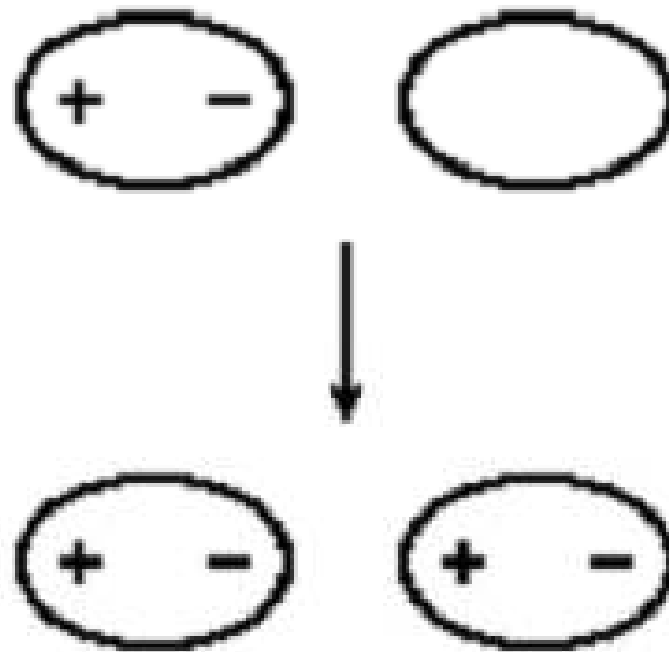
# PHÂN LOẠI

## ❖ Tương tác định hướng



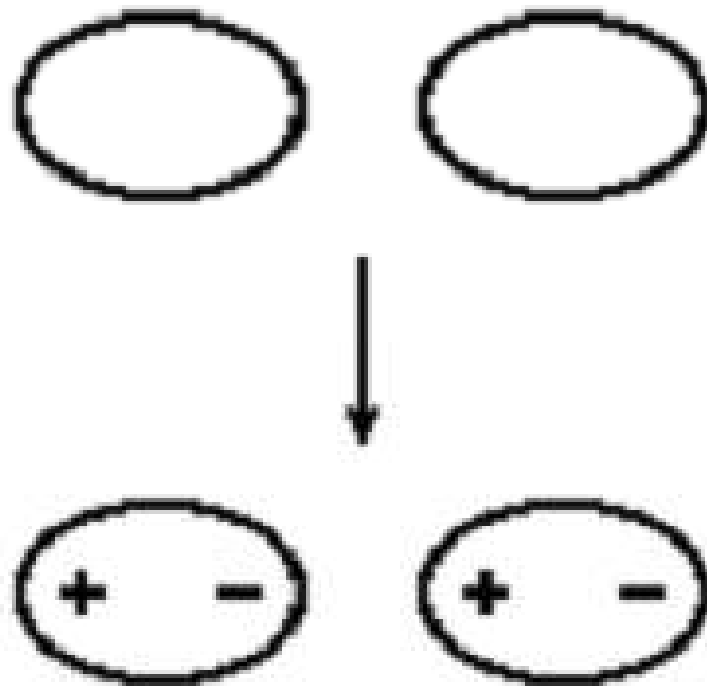
**Tương tác định hướng**

❖ Tương tác cảm ứng



**Tương tác cảm ứng**

❖ Tương tác khuếch tán



**Tương tác khuếch tán**

# TÍNH CHẤT

- ❖ Lực định hướng > Lực cảm ứng > Lực khuếch tán
- ❖ Lực VDW càng lớn khi **kích thước** (khối lượng) càng lớn

❖ Ví dụ : Trong các khí  $\text{CO}_2$ ,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{NH}_3$ , He thì khí khó hóa lỏng nhất là:

a.  $\text{CO}_2$

b.  $\text{SO}_2$

c.  $\text{NH}_3$

d. He